



TITLE:

4.自由エネルギーのクラスター展開法とCAM理論(基研研究会「相転移研究の新手法とその応用」,研究会報告)

AUTHOR(S):

中尾, 克巳; 真野, 博史

CITATION:

中尾, 克巳 ...[et al]. 4.自由エネルギーのクラスター展開法とCAM理論(基研研究会「相転移研究の新手法とその応用」,研究会報告). 物性研究 1989, 51(5): 393-406

ISSUE DATE:

1989-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93559>

RIGHT:

4. 自由エネルギーのクラスター展開法 とCAM理論

学習院大理

中尾 克巳

真野 博史

自由エネルギーをスピクラスターに展開することに依り得られる近似列は様々なスピン系に対し適用でき比較的少数のスピンのみを考慮することに依り良い収束が得られる。又、この方法は量子スピン系に対しても適用が容易である。我々はこのクラスター展開法を用いてイジング強磁性体、 $S = \frac{1}{2}$ の量子ハイゼンベルグ強磁性体に対して近似列を作り、得られた結果にSuzukiに依り提案されたコヒーレント異常法¹⁾（以下、CAM）を適用して臨界温度、臨界指数を評価した。その結果、イジング、ハイゼンベルグ両模型に対して満足いく評価ができることが解った。

本論では自由エネルギーのクラスター展開法に付いて詳しく述べることにする。我々が用いたクラスター展開法は系の自由エネルギーをスピン数毎にあらゆるクラスターパターンを考慮しながら展開するもので、第 n 次の展開では n スピンのクラスター迄を正確に取り扱うものである。この展開の長所は、展開に際し量子系に於て不可避な演算子の交換関係等への考慮が全く不用である点である。又、展開に於ける各スピクラスターに対する係数は格子系にのみ依りスピンの種類には依らないので一度或る格子に付いて計算された係数はイジング模型にも量子ハイゼンベルグ模型にも有効である。従って、量子系、古典系をほとんど同等に取り扱うことが出来る。ここではこの自由エネルギーのクラスター展開法に付いて先ず詳しく述べ、最後に計算結果の一部を紹介する。

【1】自由エネルギーのクラスター展開法

本論では主としてイジング強磁性体と $S = \frac{1}{2}$ の等方的ハイゼンベルグ強磁性体とに付いて考える。其の為には以下の様な非等方的ハイゼンベルグ強磁性体を記述するハミルトニアンを用いて自由エネルギーのクラスター展開法を定式化しておくのが便利である。

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i, j \rangle} \{ J^x \sigma_i^x \sigma_j^x + J^y (\sigma_i^x \sigma_j^y + \sigma_i^y \sigma_j^x) \} - h \sum_i \sigma_i^z \quad (1)$$

$$(J^x \geq 0, J^y > 0)$$

ここで $\sigma_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ は i 番目の格子点上でのスピン変数であり、パウリ行列で記述されるものとする。スピン間の相互作用は最隣接スピン間に限ることとし、左辺第1項目の $\langle i, j \rangle$ の和は最隣接スピン σ_i, σ_j 対に付いてとる。又 h は一様磁場である ($\mu_B = 1$ とした)。 J^x, J^y はそれぞれの方向のスピン間の相互作用の大きさである。このハミルトニアンは $J^y = 0$ とおけば $\sigma_i^z = \pm 1$ のイジング強磁性体を表し、 $J^y = J^x$ とおけば $S = \frac{1}{2}$ の等方的ハイゼンベルグ強磁性体を表す。

ハミルトニアン \mathcal{H} で記述される系の自由エネルギー F は次の様に与えられる。ここで式中の $\beta = 1/k_B T$ である。

$$- \beta F = \log [\text{Tr} \exp (-\beta \mathcal{H})] \quad (2)$$

§ 1 クラスタ展開の定式化

展開に先立ち Strieb, Callen & Horwitz²⁾ (以下 SCH と略す) に倣いパラメータ $\bar{\sigma}$ を導入し, スピン変数 σ の z 成分を次の様に変換する.

$$\eta_i = \bar{\sigma} - \sigma_i^z \quad (3)$$

ここでハミルトニアンを新しい変数 η_i に付いて 1 体の部分 \mathcal{H} と残りの部分 \mathcal{V} とに分割して書くことにする. 即ち,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} \quad , \quad (4)$$

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} z N J^2 \bar{\sigma}^2 - (z J^2 \bar{\sigma} + h) \sum_i \sigma_i^z \quad , \quad (5)$$

$$\mathcal{V} = - \sum_{\langle i, j \rangle} \{ J^2 (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + J^2 \eta_i \eta_j \} \quad . \quad (6)$$

上式中の z は最隣接格子点数であり, N は系の全スピン数である. 上式 (5) では変数 η_i を $\bar{\sigma} - \sigma_i^z$ に戻してある. この様にハミルトニアンを分割したことに対応して自由エネルギー \mathcal{F} も形式的に 2 つの部分に分割する.

$$-\beta \mathcal{F} = -\beta \mathcal{F}_0 - \beta \mathcal{F} \quad , \quad (7)$$

$$\begin{aligned} -\beta \mathcal{F}_0 &= \log [\mathcal{T} \exp (-\beta \mathcal{H}_0)] \\ &= -\frac{1}{2} z N \beta J^2 \bar{\sigma}^2 + N \log [2 \cosh (\beta (z J^2 \bar{\sigma} + h))] \quad , \end{aligned} \quad (8)$$

$$-\beta \mathcal{F} = \log [\mathcal{T} \exp (-\beta (\mathcal{H}_0 + \mathcal{V})) / \exp (-\beta \mathcal{H}_0)] \quad . \quad (9)$$

この様にしてつくった \mathcal{F}_0 を第 0 次として, \mathcal{F} をスピン数 (m ; $m=2, 3, 4, \dots$) 毎にクラスタ展開する. 以下 m スピンクラスタとは, 結晶中から m 個のスピンを取り出してそれらのスピン間の相互作用を全て考慮に入れたものを云う. こうして取り出した m スピンのクラスタには複数のパターンが存在するが, これらのクラスタパターンを $\{m\}$ と書くことにする. 式 (9) で与えられる \mathcal{F} は以下の様にスピンクラスタ展開することが出来る.

$$-\beta \mathcal{F} = -\beta \sum_{m=2}^N f_m \quad , \quad (10)$$

$$-\beta f_m = \sum_{(m)} \sum_{k=1}^m (-1)^{m-k} \sum_{(k)} \log [\mathcal{T} \exp (-\beta (\mathcal{H}_0 + \mathcal{V}_{(k)})) / \mathcal{T} \exp (-\beta \mathcal{H}_0)] \quad (11)$$

上式で、 $\{m\}$ に付いての和は結晶中で考えられる m スピンクラスターの全てのパターンを加え合わせるものであり、 $\{k\}$ の和はクラスター $\{m\}$ のサブクラスターでスピン数が k であるものすべてを加え合わせるものである。ここでサブクラスターとは元のクラスターからそれに含まれるスピンの一部を消去することによって得られるクラスターである。従ってスピン数 m のクラスターのサブクラスターの中でスピン数 k のものは ${}_m C_k$ 個存在する。対数中の指数の肩の $V_{(k)}$ は式 (6) で与えられる V に於てサブクラスター $\{k\}$ に含まれているスピン以外の、他の全てのスピン変数 (σ^x, σ^y, η) を消去したものである。

この展開は m を N 迄加え合わせた時点で元のスピン総数 N の格子の自由エネルギーに一致することが容易に示せる。又、 $\{m\}$ としては m スピンクラスターの全てのパターンを考慮する必要はなく、実際にはリンクトクラスターのみを考えれば良いことが証明できる。ここで、リンクトクラスターとは、 m 個のスピン全てが何等かの形で相互作用で結ばれており、相互作用していない 2 個以上の部分に分割されないものを云う。図 1 に考慮すべき m スピン・リンクトクラスター $\{m\}$ として具体的にどのようなものがどれだけ現れるか正方格子を例に示す。

ここで我々の自由エネルギーのクラスター展開と SCH のクラスター展開との関連について述べておく。SCH は具体的には 3 スピンのクラスター迄しか計算を行っていないが展開の一般式は与えている。我々は、展開の項を整理して見るとこの 2 つの展開は同じ結果を与えることを証明した。しかし、SCH の展開は本来リンク数、即ち、スピン間の相互作用の数に着目した展開であり、これをスピン数毎に集め直すことに依り得られる。故に、クラスターのパターンはスピン間のリンクの構造に依って分類される。更に、サブクラスターもスピン間のリンクを取り去ることで作り、リンク数で分類する。対して、我々の行った展開はスピン数でクラスターを分類したものであり、スピン間のリンクはクラスターのスピンに対し全て考慮に入れる。従って、両者には当然のことながら、展開の形式に構造的違いが現れる。この相違はリンクの閉じたループが現れるとき、明確になる。ここで実際に三角格子 ($z=6$) を例に取ってこれらの展開中の 3 スピンの項を書き下してみよう。

④SCH

$$\begin{aligned}
 -\beta f_3 &= 9N(-\beta f_{\text{---}}) + 6N(-\beta f_{\text{---}}) + 2N(-\beta f_{\text{---}}) \\
 &= 9N[1 \log \langle \text{---} \rangle - 2 \log \langle \text{---} \rangle] \\
 &\quad + 6N[1 \log \langle \text{---} \rangle - 2 \log \langle \text{---} \rangle] \\
 &\quad + 2N[1 \log \langle \text{---} \rangle - 3 \log \langle \text{---} \rangle + 3 \log \langle \text{---} \rangle] \quad (12)
 \end{aligned}$$

③破線で表したリンクはクラスターのパターンを明確にする為書き加えたもので、実際に考慮はしない。

⑤Ours

$$\begin{aligned}
 -\beta f_3 &= 9N(-\beta f_{\text{---}}) + 2N(-\beta f_{\text{---}}) \\
 &= 9N[1 \log \langle \text{---} \rangle - 2 \log \langle \text{---} \rangle] \\
 &\quad + 2N[1 \log \langle \text{---} \rangle - 3 \log \langle \text{---} \rangle] \quad (13)
 \end{aligned}$$

図1 スピנקラスターのパターンと出現数

◎ 2次元正方格子 (周期境界条件 全スピン数 N)

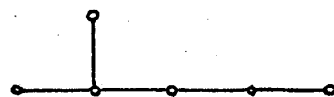
$n = 2$

① $2N$



$n = 6$ (続)

② $52N$

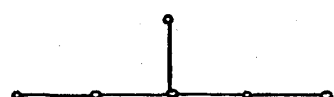


$n = 3$

② $6N$



③ $32N$

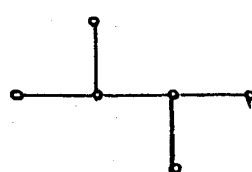


$n = 4$

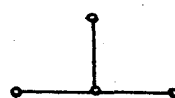
① $14N$



④ $4N$



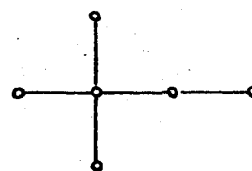
② $4N$



③ $1N$



⑤ $4N$

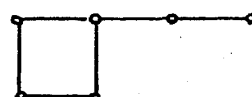


$n = 5$

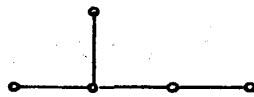
① $34N$



⑥ $16N$



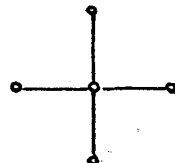
② $20N$



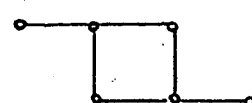
⑦ $12N$



③ $1N$



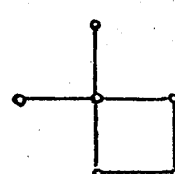
⑧ $8N$



④ $8N$

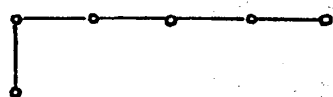


⑨ $4N$

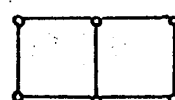


$n = 6$

① $82N$



⑩ $2N$



ここで $f(\dots)$ はクラスターパターン $\{\dots\}$ からの自由エネルギーへの寄与を表し、 $\langle \dots \rangle = \text{Tr} [\exp(-\beta(\mathcal{H} + V(\dots)))] / \text{Tr} [\exp(-\beta\mathcal{H})]$ である。

⑧の我々の展開では、3スピクラスターとしては $\{ooo\}$ が $9N$ 個、 $\{\triangle\}$ が $2N$ 個存在する。対して④SCHの展開ではリンクに依ってクラスターを区別するので、スピン配置は $\{\triangle\}$ と同じでもリンク構造の違うものとして新たに $\{\triangle\}$ なるパターンを別のものとして考えねばならない。さらにサブクラスターの数え上げに於いても、⑧がスピンを取り去ることでサブクラスターを作り出すのに対して④はリンクを取り去ることでサブクラスターを作り出している。その為④では $\{\triangle\}$ のサブクラスターとして $\{\triangle\}$ が $(-)$ の符号を持って現れている。

従って、両者ではサブクラスターを含めて表現が異なることになる。しかし項を整理してみると④では $\{\triangle\}$ のパターンは相殺されてしまい、どちらも同じ展開を与えていることが判る。しかし、具体的に計算を進めようとする、サブクラスターの数え上げなどを観ても判るように④の展開は最終的には相殺されて自由エネルギーの展開に寄与しないパターンを含みかなり煩雑である。実際、考慮すべきスピン数が大きくなり閉じたループを持つクラスターパターンが数多く現れる様になるとSCHのリンク展開は我々のスピン展開で考慮すべきクラスターパターン数よりかなり多い、スピン数の階乗に近い、数のパターンを考慮しなくてはならなくなり、取扱の困難さが急速に増大する。対し我々のスピクラスターに依る自由エネルギーの展開は、前にも述べた通りSCHの展開と同一の結果を与えるが、SCHのリンクパターンに依る展開のうちで結局は展開に寄与しないリンクパターンを自動的に消去した構造を持っており、具体的に計算を進めていく上では本質的に有利である。

§2 クラスタ展開の再定式化

ここで、我々のクラスター展開を実際に計算を行うのに便利な様に再定式化しておこう。式(11)に於ける定式化では $V_{(k)}$ は1スピンのクラスターでは0であり、1スピンのクラスターからの寄与は表面的には現れないが、展開の項を整理すると対数中の分母の \mathcal{H} の中からの1スピンの寄与が現れ展開をまとめ上げるのに不向きである。そこで1スピクラスターが他のスピクラスターと同等に扱える様に展開を整理しておく方が取扱易い。式(11)のサブクラスターに付いての和の部分

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^m (-1)^{m-k} \sum_{(k)} \log [\text{Tr} \exp(-\beta(\mathcal{H} + V_{(k)})) / \text{Tr} \exp(-\beta\mathcal{H})] \\ &= \sum_{k=1}^m (-1)^{m-k} \sum_{(k)} \log [\text{Tr}_{(k)} \exp(-\beta(\mathcal{H}_{(k)} + V_{(k)}))] \\ &= \sum_{k=1}^m (-1)^{m-k} \sum_{(k)} \log [\text{Tr}_{(k)} \exp(-\beta\mathcal{H}_{(k)})], \end{aligned} \quad (14)$$

の様に分けて書く。ここで、 $\mathcal{H}_{(k)}$ は \mathcal{H} の中からサブクラスター $\{k\}$ に含まれるスピンのみを取り出したものであり、 $\text{Tr}_{(k)}$ はサブクラスター $\{k\}$ に含まれるスピンに付いてとる。元々 \mathcal{H} は1体のハミルトニアンであるから1スピン毎に分けて考えることができ、 $\{k\}$ に含まれないスピンの部分は分子分母で相殺してしまうからである。式(14)に於いて、第2項目の和は0となることが証明でき、第1項目の和のみを考えれば良いことが判る。 $\mathcal{H}_{(k)} + V_{(k)}$ 中に現れる σ^2 に比例する定数項は、サブクラスター間で打ち消し合い $m \geq 3$ の $\{m\}$ クラスタからの自由エネルギーへの寄与には現れないことが証明できる。式(8)で与えられる0

次の自由エネルギー \mathcal{F}_0 に現れる $\bar{\sigma}^2$ に比例する項は $m=2$ のクラスターからの寄与により打ち消される。従って、2スピנקラスター以上に展開を進めれば $\bar{\sigma}^2$ に比例する項は考慮する必要がなくなる。

以上をまとめると自由エネルギーのクラスター展開の式(7)～(11)は次の様に整理される。

$$\begin{aligned}
 -\beta \mathcal{F} &= -\beta \sum_{m=1}^N f_m, \\
 -\beta f_m &= \sum_{\{m\}} \sum_{k=1}^m (-1)^{m-k} \sum_{\{k\}} \log [\text{Tr} \exp (-\beta \mathcal{H}_{\{k\}})] . \quad (15)
 \end{aligned}$$

ここで、 $\mathcal{H}_{\{k\}}$ は $\mathcal{H}_{\{k\}} + V_{\{k\}}$ から $\bar{\sigma}^2$ に比例する定数項を除いたものである。この様に展開を再定式化することに依り1スピנקラスターを含め全てのスピנקラスターを同等に取り扱うことが可能となる。

$\mathcal{H}_{\{k\}}$ の具体的な形を三角格子(等方的： $J^x = J^y = J$ と置いた場合。)に対し、始めの数項に付いて書いてみると次の様になる。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\{o\}} &= L_0 \sigma_1^2, \\
 \mathcal{H}_{\{o-o\}} &= J \sigma_1 \sigma_2 + L_1 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2), \\
 \mathcal{H}_{\{o-o-o\}} &= J (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3) + L_1 (\sigma_1^2 + \sigma_3^2) + L_2 \sigma_2^2, \\
 \mathcal{H}_{\{\Delta\}} &= J (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1) + L_2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2), \quad (16)
 \end{aligned}$$

但、 $L_q = (z - q) J \bar{\sigma} + h$ である。又展開の具体的な形を再び三角格子の3スピנקラスターからの寄与を例に取って書き下してみると次の様になる。

$$\begin{aligned}
 -\beta f_3 &= 9N (-\beta f_{\{o-o-o\}}) + 2N (-\beta f_{\{\Delta\}}) \\
 &= 9N [1 \log \langle \text{---} \rangle - 2 \log \langle \text{---} \rangle + 1 \log \langle \circ \rangle] \\
 &\quad + 2N [1 \log \langle \Delta \rangle - 3 \log \langle \text{---} \rangle + 3 \log \langle \circ \rangle], \quad (17)
 \end{aligned}$$

但、 $\langle \cdots \rangle = \text{Tr}(\cdots) \exp (-\beta \mathcal{H}(\cdots))$ である。

更に我々のクラスター展開におけるサブクラスターの数え上げに付いては次の様なことが証明されているので、実際の計算に於いては全てのサブクラスターの寄与を書き下す必要はない。

『サブクラスターとして展開項 $f_{\{m\}}$ (クラスターパターン $\{m\}$ の寄与)に寄与するものは次の条件を満たすものに限られる。

1° サブクラスター $\{k\}$ はリンクトクラスターである。

- 2° $\{k\}$ を元のクラスター $\{m\}$ から切り出す為に取り除いた $m-k$ 個のスピンは全て $\{k\}$ に直接リンクされたものである。

』

この性質を利用すればサブクラスターの計算は相当簡略化される。例えば m 個のスピンの紐から成る紐の様なパターン $\{m\} = \{ \circ - \circ - \dots - \circ - \circ \}$ のサブクラスターとして和に寄与するものは、2個の $(m-1)$ 個のスピンの紐と1個の $(m-2)$ 個のスピンの紐のみである。

又、この性質からクラスター $\{m\}$ からの自由エネルギーの寄与はそのクラスターをぐるりと包み込む様なパターンが出現する段階で消えてしまうことが導かれる。何故なら、或るパターン $\{m\}$ に対してそれを包み込む様なパターン $\{M\}$ が生じた段階でもうそのパターン $\{m\}$ はサブクラスターとしては以降出現しない。一方、和を最後まで取り尽くしてしまうと、自由エネルギーの展開で寄与が残るパターンはスピンの数 N の元の格子のみとなるからそのパターン $\{m\}$ からの寄与は $\{m\}$ がサブクラスターとして出現するスピンの数 M 迄で打ち消し合っていないからである。例えば三角格子での1スピンのクラスターは図2の様にそのスピンをすっぽり包み込むパターンが出現する7スピンのクラスター迄を考慮した段階で自由エネルギーの展開から消失する。

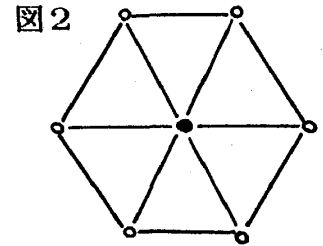


図2

§3 nスピンのクラスター近似

前節で定式化した自由エネルギーのクラスター展開を n スピンのクラスターまでで打ち切ることにより自由エネルギーの近似列 \mathcal{F}_n が得られる。

$$-\beta \mathcal{F}_n(\bar{\sigma}, h) = -\beta \sum_{m=1}^n f_m. \quad (18)$$

この様にして得られる \mathcal{F}_n には n スピンのクラスターのみではなく n 以下のスピンの様々なクラスターからの寄与が $(+)$ 又は $(-)$ の符号を持って入り込んでおり、其の構造は単純ではない。この n スピンのクラスター近似での自由エネルギー \mathcal{F}_n には展開に際して導入したパラメータ $\bar{\sigma}$ が含まれている。式(16)から判る様にパラメータ $\bar{\sigma}$ に依りクラスター内のスピンの働く有効場が定められており、 $\bar{\sigma}$ は系のオーダーパラメータの役割を果たしている。そこで、このパラメータ $\bar{\sigma}$ はこの \mathcal{F}_n が最小になるように決めてやることにする。即ち、

$$\frac{\partial (-\beta \mathcal{F}_n)}{\partial \bar{\sigma}} = 0, \quad (19)$$

に依り n スピンのクラスター近似に於ける $\bar{\sigma}$ を $\bar{\sigma}_n = \bar{\sigma}_n(h, T)$ の様に決める。これがこの近似に於ける平均場近似でのセルフ・コンシステント条件に対応するものである。

こうして得られた n スピンのクラスター近似の自由エネルギーを用いて系の磁化 M 、帯磁率 χ 等は統計力学に従い次の様に計算される。

$$M = \frac{\partial (-\beta \mathcal{F}_n)}{\partial h}, \quad (20)$$

$$\chi = \frac{dM}{dh} = \frac{\partial^2 (-\beta F_n)}{\partial h^2} + \frac{\partial^2 (-\beta F_n)}{\partial \bar{\sigma} \partial h} \cdot \frac{\partial \bar{\sigma}_n}{\partial h} \quad (21)$$

この様にして作られた近似は1スピン近似 (F_0 のみ) で分子場近似と, 2スピクラスター迄考慮した近似ではコンスタント・カップリング近似と一致した結果を与える。

§4 臨界点近傍での振舞い

先ず, n スピクラスター近似の自由エネルギー F_n を $\bar{\sigma}$ と h で展開してみる。展開に際し系の対称性依り $\bar{\sigma}$, h の奇数次は0となる。

$$\begin{aligned} F_n/N = & f_0 + f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \bar{\sigma}^2 + f_{\bar{\sigma}h} \bar{\sigma} h + f_{hh} h^2 \\ & + f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \bar{\sigma}^4 + f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}h} \bar{\sigma}^3 h + f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}hh} \bar{\sigma}^2 h^2 + f_{\bar{\sigma}hhh} \bar{\sigma} h^3 + f_{hhhh} h^4 + \dots \end{aligned} \quad (22)$$

臨界点近傍, $T \sim T_c$ に於いては $f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} = b\varepsilon$ ($\varepsilon = (T - T_c)/T_c$, $b > 0$), $f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} > 0$ となっており, 以下ランダウの2次相転移理論とほとんど平行して議論を進めることができ, $T \sim T_c$ に於ける磁化 M , 帯磁率 χ は次の様に求められる。

④ $T \lesssim T_c$ に於いて

$$M = \bar{m}_s \cdot |\varepsilon|^{1/2}, \quad \bar{m}_s = -f_{\bar{\sigma}h} [b/2f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}}]^{1/2} \quad (23)$$

⑤ $T = T_c$ に於いて

$$M = \bar{m}_c \cdot h^{1/3}, \quad \bar{m}_c = -f_{\bar{\sigma}h} [-f_{\bar{\sigma}h}/4f_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}}]^{1/3} \quad (24)$$

⑥ $T \gtrsim T_c$ に於いて

$$\chi = \bar{\chi} \cdot \varepsilon^{-1}, \quad \bar{\chi} = (f_{\bar{\sigma}h})^2 / 2b \quad (25)$$

以上の3式依り

$$\frac{\bar{\chi} \cdot \bar{m}_s^2}{\bar{m}_c^3} = 1 \quad (26)$$

なる関係式が得られる。CAM理論¹⁾に依れば臨界係数 \bar{m}_s , \bar{m}_c , $\bar{\chi}$ は近似を進め T_c をより正しい値 T_c^* に近付けるに連れて以下の様に発散することが期待される。

$$\bar{m}_s \simeq \frac{f_s}{(T_c - T_c^*)^p}, \quad (27)$$

$$\bar{m}_c \simeq \frac{f_c}{(T_c - T_c^*)^q}, \quad (28)$$

$$\bar{\gamma} \simeq \frac{f_\gamma}{(T_c - T_c^*)^\psi}. \quad (29)$$

以上の3式と式(26)を合わせることにより次のCAMの指数 p , q , ψ に関するスケーリング関係式を得る.

$$\psi + 2p - 3q = 0. \quad (30)$$

これらの式で定義される指数 p , q , ψ はCAM理論に依り臨界指数 β , γ , δ と $p = \frac{1}{2} - \beta$, $q = \gamma(\delta - 3) / [3(\delta - 1)]$, $\psi = \gamma - 1$ の様に関係付けられており, 式(30)は良く知られているスケーリング則 $\gamma = \beta(\delta - 1)$ を表している.

【2】臨界温度と臨界係数

自由エネルギーのクラスター展開法から得られる近似列を用いて実際に臨界温度や臨界係数を計算した結果を示す. 近似列を計算する為に各クラスターパターンと其の出現数, そしてサブクラスターを数え上げた格子系は現在のところ2次元では正方格子($n=7$ 迄), 三角格子($n=6$ 迄)であり, 3次元では単純立方格子($n=7$ 迄), 面心立方格子($n=5$ 迄)である. こうした格子に対してイジング模型を2次元と3次元に付いて, 又, $S = \frac{1}{2}$ 等方的ハイゼンベルグ模型を3次元に付いて考え, それぞれ各スピン数クラスター近似で臨界温度 T_c と前章で述べた臨界係数(量子系では今のところ帯磁率の係数 $\bar{\gamma}$ のみ)を計算した.

§1 イジング模型

どの格子系に於いても近似を進める(取り扱うクラスターのスピン数を多くする)に従い系の臨界温度 T_c は小さくなり真の臨界温度 T_c^* に近づいていくと思われる. 又, 得られた T_c に対して帯磁率や磁化の臨界係数は系統的に発散する方向に変化している. 三角格子, 面心立方格子の場合, 近似を進めるに従い T_c は単調に減少し, それに応じて $\bar{\gamma}$, \bar{m}_s も単調に増加している. 一方, 正方格子, 単純立方格子の場合, 2スピン近似と3スピン近似は完全に一致した結果を与える. 又, 4スピンと5スピン, 6スピンと7スピンの結果も近いものとなっている. これは三角格子や面心立方格子の振舞いと大きく異なる点である. 以下表1に各近似で得られた T_c (J/k_B を単位とする)と $\bar{\gamma}$, \bar{m}_s を示す.

§ 2 量子ハイゼンベルグ模型 ($S = \frac{1}{2}$)

等方的ハイゼンベルグ模型に於いて計算された T_c , $\bar{\chi}$ を表 2 に示す. 量子系でも面心立方格子の場合はイジング模型でのとき同様 T_c , $\bar{\chi}$ は単調に変化してゆく. 一方, 単純立方格子に於ては近似の系列 (考慮するクラスターのスピンの数 n) に対して臨界温度 T_c が単調に変化していない事が上げられる. 表 2 依り明かな通り偶数スピンクラスター迄を考慮した近似での T_c の低下が目立つ. 尤, $\bar{\chi}$ の振舞いは T_c の振舞いに応じており, コヒーレントな異常を示している.

表 1 イジング強磁性体

① 正方格子

 $d = 2, z = 4$

Approx.	T_c	$\bar{\chi}$	\bar{m}_s
1-spin	4.	.25	1.73205081
2	2.88539008	.5	2.35482005
3	2.88539008	.5	2.35482005
4	2.65494279	.68647159	2.59784400
5	2.63538774	.71913127	2.77047333
6	2.56558714	.82160175	2.78023862
7	2.54368851	.87927528	3.01818805

② 三角格子

 $d = 2, z = 6$

Approx.	T_c	$\bar{\chi}$	\bar{m}_s
1-spin	6.	.16666667	1.73205081
2	4.93260692	.25	2.09261157
3	4.49802885	.33103723	2.34957929
4	4.30355701	.39435504	2.52301670
5	4.19345827	.44670924	2.66014702
6	4.11493319	.49960027	2.86828888

③ 単純立方格子

 $d = 3, z = 6$

Approx.	T_c	$\bar{\chi}$	\bar{m}_s
1-spin	6.	.16666667	1.73205081
2	4.93260692	.25	2.09261157
3	4.93260692	.25	2.09261157
4	4.76992859	.28533990	2.24699554
5	4.76445867	.28740242	2.27580575
6	4.69303470	.31346712	2.37942751
7	4.68961136	.31530691	2.40653750

④面心立方格子
 $d=3, z=12$

Approx.	T_c	$\bar{\chi}$	\bar{m}_s
1-spin	12.	.08333333	1.73205081
2	10.96962990	.1	1.89212377
3	10.59477141	.11108606	2.00766306
4	10.40183149	.11957571	2.09766642
5	10.28771065	.12629827	2.16578481

表2 $S=\frac{1}{2}$ ハイゼンベルグ強磁性体

①単純立方格子 ($d=3, z=6$)

Approx.	T_c	$\bar{\chi}$
1-spin	6.	.16666667
2	3.64095691	.5
3	4.16507345	.30157091
4	3.58972825	.56374725
5	3.86836239	.37604995
6	3.52557388	.63746282
7	3.73706415	.43138467

②面心立方格子 ($d=3, z=12$)

Approx.	T_c	$\bar{\chi}$
1-spin	12.	.08333333
2	9.86521385	.125
3	9.31550585	.14604913
4	9.02194340	.16418750
5	8.85731027	.17790320

【3】CAM理論を用いた臨界現象の解析

前章で示した自由エネルギーのクラスター展開法の近似列の計算値からCAM理論を用いて真の臨界温度と臨界指数を評価してみた。数値の決定には近似列に依って得られた臨界温度と臨界係数に対して最小二乗法を利用した。先ず、近似列の臨界温度 T_c と帯磁率臨界係数 $\bar{\chi}$ に関するCAM関係式(27)を用いて真の臨界温度 T_c^* とCAM臨界指数 ψ 、そして係数 f_x をフィットした。こうして得られた T_c^* を既知として磁化臨界係数 \bar{m}_s に関する式(27)からCAMの指数 p と係数 f_p をフィットした。式(27)を用いて T_c^* を評価することもできるが、 \bar{m}_s を用いたフィットは $\bar{\chi}$ を用いたフィットに比べてかなり悪くなる。

表3, 4中に示した最小二乗法による最適値の下に書き込んだ±の数値は二乗和を最小値 $S_{min.}$ から $+2\sqrt{(S_{min.})}$ 迄大きくなることを許してフィットした際に得られる値のずれである(磁化の臨界指数では計算していない)。これらの数値は得られた数値の不定性を反映しているものと考えられる。

§ 1 イジング模型

2次元格子での値は1スピン近似(分子場近似)を含め計算した近似点全てを用いてフィットした。対して3次元格子では1スピン近似を除く全ての近似点を用いた。3次元系で1スピン近似を除いたのは、1スピン近似が T_c の値から見ても2スピン以上の近似と比べかなり悪いレベルにいる為である。実際3次元の場合 S_{min} は1スピン近似をいれない方がフィットは良くなる(ほぼ1桁良い)。一方、2次元系ではデータ点のばらつきが3次元系に比べ大きく、1スピン近似をデータ点に加えた方が二乗和 S_{min} が若干小さくなるからである。

S_{min} の値は2次元系では正方格子で 10^{-4} 程度、三角格子では 10^{-6} 程度である。又、3次元系では単純立方格子で 10^{-7} 程度、面心立方格子では 10^{-9} 程度である。2次元系でのフィットは3次元系のものに比べて悪く S_{min} の値を觀ても2~3桁も大きい。正方・単純立方格子と三角・面心立方格子を比べても同様の事が云える。イジング模型では前章で述べた通り正方・単純立方格子では2スピン近似と3スピン近似の値が等しいのを始め4・5スピン、6・7スピンでも値が非常に近い為、実質的にデータ点の数が少ないという事もあるのであろう。

本論では詳しくは述べないが、単純立方格子の平面方向と其の面に垂直な方向との相互作用を分けて垂直方向を0から平面成分に等しくなる迄変化させた計算も行い、2次元~3次元の変化に対する臨界現象の変化を觀た。其の結果、 T_c は単調に増加しているのに対し臨界指数は垂直方向の相互作用が0の近傍を除き、ほぼ単純立方格子の値を採り、ユニバーサリティー仮説⁵⁾を支持する結果を得た。

§ 2 量子ハイゼンベルグ模型

量子系では1スピン近似を除く全ての近似点を用いて最小二乗法でフィットした。1スピン近似を除いたのは、イジング模型での理由と共に分子場近似では全く量子性が現れていないからである。フィットはイジング模型と比べると悪く、 S_{min} の値は単純立方格子で 10^{-4} 程度、面心立方格子で 10^{-7} 程度である。しかし面心立方格子はかなり良い結果を示し、高温展開の結果と一致している。一方、単純立方格子では偶数スピン近似と奇数スピン近似とが異なる振舞いをしている様である。

更に、相互作用 J を0から J 迄変化させ、イジング~ハイゼンベルグ模型の変化を面心立方格子で觀た。其の結果臨界指数の振舞いはユニバーサリティー仮説⁵⁾を支持している。

表3 臨界温度, 臨界指数 イジング模型

Lattice type			Tc*	ψ	p	高温展開 ³⁾		
	d	z				Tc	$\gamma-1$	$\frac{1}{2}-\beta$
SQ	2	4	2.2916 +.0590 -.0813	.6540 +.1157 -.0899	.2748	2.2692	.75	.375
TR	2	6	3.6769 +.0334 -.0369	.6564 +.0334 -.0274	.2937	3.6410	.75	.375
SC	3	6	4.4946 +.0232 -.0278	.2863 +.0288 -.0243	.1686	4.5102	.25	.188
FCC	3	12	9.7376 +.0090 -.0093	.2895 +.0034 -.0033	.1679	9.7944	.25	.188

③ 2次元系は厳密解

表4 臨界温度, 臨界指数 $S = \frac{1}{2}$ ハイゼンベルグ模型

Lattice type			Tc*	ψ	高温展開 ⁴⁾	
	d	z			Tc	$\gamma-1$
SC	3	6	3.3237 +.0960 -.2352	.5349 +.3453 -.1619	3.3490	.43
FCC	3	12	8.0696 +.0796 -.0934	.4291 +.0352 -.0303	8.0256	.43

【4】まとめ

自由エネルギーのスピクラスター展開を用いて得られる近似列の臨界温度 T_c と臨界係数 $\bar{\gamma}$, \bar{m} に対してCAM理論を適用して真の臨界温度 T_c^* とCAMの指数 ψ , p (臨界指数 γ , β に対応)の評価をした。其の結果, 我々の近似列はCAMを適用するのに非常に有効な道具であることが示された。比較的少ないスピン数の考慮に依り良い収束を示すこの近似列は量子スピン系でも古典系と同様に扱える利点がある。

イジング模型に対する適用では総じて2次元系でのCAMへのフィットは余り良くないが, 3次元系では良くフィットできた。又, 三角, 面心立方格子に比べて正方, 単純立方格子の場合はフィットが良くない。臨界指数は次元性を明らかに示している。正方格子, 単純立方格子で得られた臨界指数の数値そのものはKatori & Suzuki⁶⁾のクラスター平均場近似に依るものの方が真の値に近いものを与えているものの, CAM関係式へのフィットの良さと云う観点に立つと得られた数値の不定性は我々の方が小さい。

一方量子系の $S = \frac{1}{2}$ ハイゼンベルグ模型では面心立方格子は良好な結果で, 臨界指数も $\gamma = 1.43$ と云う高温展開と一致する値が得られた。しかし, 単純立方格子では偶数スピンと奇数スピンとで振舞いが異なり良いフィットが得られない。高温展開でも $S = \frac{1}{2}$ 単純立方格子は他の場合と比べ収束が極めて悪いことが報告されているので⁷⁾ここでも其の性質が現れているのかも知れない。

本論で示した計算結果は自由エネルギーのクラスター展開法を用いて得られる近似列にCAMを適用した際の有効性を確認する為のものであるが, 臨界温度 T_c^* の値は厳密解や高温展開に依るものと比べて観ても数%以下のずれであり充分満足 of いくものである。量子系への適用の容易さはCAM理論と合俟って様々な量子スピン系の臨界現象の評価に有効であろう。今後の量子系への適用の可能性としては, すぐに用いられるものとして反強磁性体や希釈スピン系, スピン $S = \frac{1}{2}$ 以外の量子ハイゼンベルグ系などが考えられ, 現在計算を進めている。

References

- 1) M.Suzuki : J. Phys. Soc. Jpn. 55(1986)4205
M.Suzuki, M.Katori and X.Hu : J. Phys. Soc. Jpn. 56(1987)3092
- 2) B.Strieb, H.B.Callen and G.Horwitz : Phys. Rev. 130(1963)1798
- 3) 小口武彦 : 磁性体の統計理論 (裳華房 物理学選書12)
- 4) G.A.Baker Jr., H.E.Gilbert, J.Eve and G.S.Rushbrooke : Phys. Rev. 164(1967)800
- 5) R.B.Griffiths : Phys. Rev. Letters 24(1970)1479
- 6) M.Katori and M.Suzuki : J. Phys. Soc. Jpn. 56(1987)3113
- 7) D.R.Ritchie and M.E.Fisher : Phys. Rev. B5(1972)2668